

Ação antioxidante do resveratrol e análogos, frente radicais maléficos à saúde por modelagem molecular

Renata Manoel Silva¹ (IC), Guilherme V. M. de A. Vilela^{1*} (PQ) guilherme.vilela@ifrj.edu.br

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro campus Duque de Caxias (IFRJ).

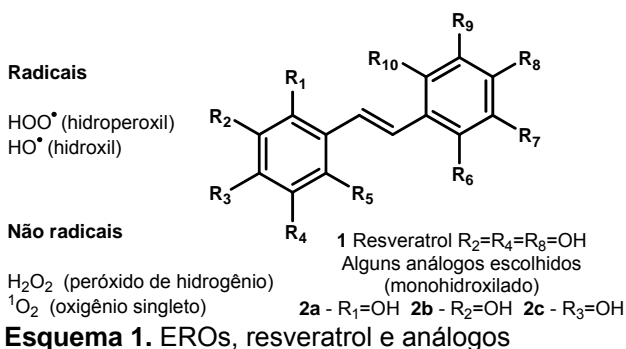
Palavras Chave: resveratrol, antioxidante, radical, modelagem molecular, DFT e MP2

Introdução

A dieta do Mediterrâneo é o ponto chave no padrão de vida saudável na população da região do mar Mediterrâneo, sendo baixos os casos de doenças cardiovasculares, degenerativas, pulmonares e câncer.¹ O vinho tinto é consumido regularmente nas refeições e estudos revelam altos índices de flavonóides (polifenóis), espécies responsáveis pela inibição do estresse oxidativo descontrolado no organismo humano.² Uma das principais substâncias presente na casca da uva preta é o resveratrol, conhecido como antioxidante mais forte do que as vitaminas C e E.

Resultados e Discussão

Resolvemos avaliar através da modelagem molecular (DFT e MP2), resveratrol e seus análogos (*trans* estilbenos mono hidroxilados) frente às espécies reativas do oxigênio (EROs), **Esquema 1**.



A reação estudada consiste em abstrair um hidreto de uma hidroxila no resveratrol e nos *trans*-estilbeno monohidroxilado pelas EROs. Do ponto de vista teórico (DFT 6-311+G**//6-31G**), praticamente todas as reações em fase gás dos monofenóis *trans*-estilbeno nas posições *orto* (**2a**), *meta* (**2b**) e *para* (**2c**) com as Eros (O₂, HOO[•] e HO[•]) mostraram-se extremamente favoráveis entalpicamente (Kcal/mol), **Tabela 1**. As reações com resultados diferentes são com HOO[•], na espécie **2b** não é favorável, porém nas outras espécies **2a** e **2c** são favoráveis. Os valores de entropia (ΔS) calculados em fase gás não reproduzem os resultados experimentais, neste caso não podemos confiar no ΔG da reação, sendo entalpia o parâmetro avaliado.

Tabela 1. Valores de ΔH (Kcal/mol) para *trans*-estilbenos monohidroxilado

Espécie	EROs		
	O ₂	HOO [•]	HO [•]
2a	- 9,0	- 4,4	- 36,8
2b	- 4,2	0,3	- 32,0
2c	- 9,8	- 5,3	- 37,7

De acordo com ΔH das reações, a ordem de estabilidade está relacionada às posições *para* (**2c**), *orto* (**2a**) e *meta* (**2b**). Uma explicação é o número de estruturas canônicas presente e altamente contribuintes para híbrido de ressonância. Os radicais provenientes do **2a** e **2c** apresentam 14 estruturas canônicas (dois carbonos radicais terciários) e por sua vez, o radical proveniente do **2b** apresenta apenas 9 estruturas canônicas (nenhum carbono radical terciário). A mesma tendência ocorre nas reações com o resveratrol, **Tabela 2**. A abstração do hidreto na hidroxila da posição 8 (*para*) é a mais favorável.

Tabela 2. Valores de ΔH (Kcal/mol) para resveratrol

R _x = O [•] R _{y e z} = OH	EROs		
	O ₂	HOO [•]	HO [•]
X = 2	- 3,1	- 0,9	- 37,4
X = 4	- 2,8	1,2	- 32,0
X = 8	- 8,1	- 4,1	- 37,8

Conclusões

Estudos teóricos nas espécies **1**, **2a**, **2b** e **2c** demonstraram poder antioxidante, formando radicais bastante estáveis. A modificação das posições das hidroxilas fenólicas nos análogos é importante na estabilidade do radical. Resultados mais coerentes de ΔG vão ser adquiridos teoricamente em fase aquosa. Como perspectivas, avaliar a estabilidade por OMF em MP2 6-311⁺⁺G** e fazer comparações com outros antioxidantes.

Agradecimentos

IFRJ pelas bolsas PIBID-Jr e Pró-ciência 2009

¹ Zelmanowicz, R. U. Dieta do Mediterrâneo, 1^a ed.; Porto Alegre; ABC da Saúde, **2005**.

² Halliwell, B.; Gutteridge, J.M.C. *Free Radical Biol. and Med.*, 4th ed.; Oxford University Press: Oxford, **2007**.

³ Becke, A. D. *Phys. Rev. A* **1988**, *38*, 3098-3100.

⁴ Lee, C.; Yang, W.; Parr, R. G. *Phys. Rev. B* **1988**, *37*, 785-789.